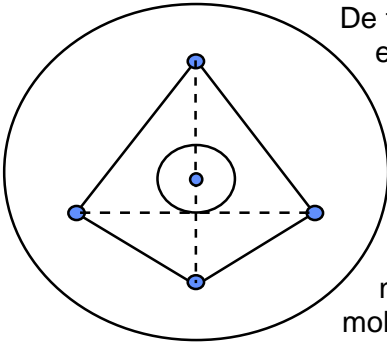


## TEORIA ATOMICA – PARTE II

Carlos Corredor, Ph.D.

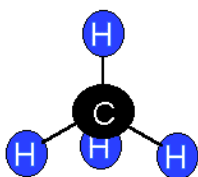
### *Concepción práctica de los átomos relacionados con la vida*



De toda la discusión anterior podemos deducir que para todos los efectos prácticos, en la ventana de temperatura de la biosfera, en un determinado nivel energético sólo se pueden encontrar uno o dos electrones, y que si hay dos electrones, éstos deben tener número de espín opuesto. De acuerdo con esta regla general y con la tabla de números cuánticos que vimos más arriba, podemos tratar de imaginar la configuración de los elementos del segundo período de número atómico 6, 7 y 8 (C, N y O), que son la base de las moléculas que tienen que ver con la vida. Comencemos con el

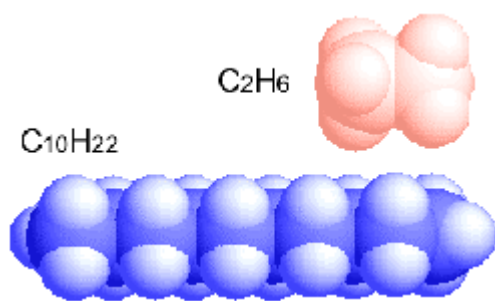
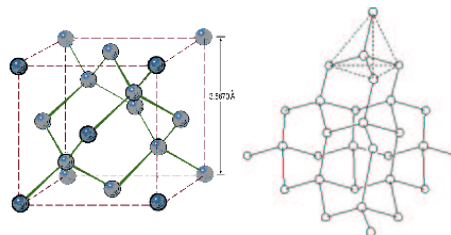
caso del carbono. Con seis electrones tendríamos que acomodar a los dos que tienen un número cuántico principal de 1, en una primera capa esférica. Los cuatro electrones restantes tienen energías similares y deberán ocupar un espacio en el que de acuerdo con la tabla caben ocho electrones apareados de a dos en dos. Como no tenemos sino cuatro y teniendo en cuenta que su campo eléctrico los alejará lo más posible el uno del otro, la probabilidad máxima de encontrar a uno cualquiera de ellos será en uno de los cuatro vértices de un tetraedro inscrito en una esfera cuyo diámetro depende de la energía de los electrones.

Esto, de por sí, no tiene importancia. De hecho, llegamos a la misma conclusión que se deriva de consideraciones cuantomecánicas. Tan sólo nos diferenciamos de ellas por llegar directamente a este resultado sin necesidad de hablar de orbitales híbridos entre un orbital esférico 2s y tres orbitales ovoides 2p. Lo que es verdaderamente interesante es que de acuerdo a nuestro experimento mental llegamos a la conclusión de que no será posible a temperaturas como las que existen la biosfera que un electrón se encuentre sólo en un determinado nivel energético. De esto se deriva que el carbono sólo podrá estar en un estado estable en estas condiciones, si todos sus electrones se encuentran apareados. Pero aquí tenemos el problema de que el apareamiento no puede hacerse entre los electrones propios que tratarán de estar lo más alejados posible uno de otro. Por consiguiente, será necesario concluir que cada electrón se apareará con otro electrón de otro elemento que a su vez se encuentre sólo en su propio orbital.



¿Con qué tipo de elementos se podrá aparear cualquiera de los electrones de un carbono? La respuesta es simple: con cualquiera cuya geometría permita una aproximación adecuada y permita que una vez los dos electrones compartan un orbital, su eje mantenga, por lo menos aproximadamente, la geometría del tetraedro. De esta manera, el elemento más simple con el que el carbono podrá compartir electrones es el hidrógeno. Sin embargo, también los podrá compartir con otro carbono, con nitrógeno o con oxígeno. El resultado, a su vez, es interesante.

Volvamos al espacio interestelar, pero esta vez llevemos varios carbonos e hidrógenos y utilicémoslos como si fueran las piezas de un mecano para armar figuras. Si aproximamos cuatro hidrógenos a un carbono, simplemente se nos unirán en forma tal que resulta un tetraedro cuyos vértices son los protones y el centro el carbono. Por el otro lado, si juntamos varios carbonos, el electrón de cada vértice se apareará con el electrón del vértice de otro carbono, dándonos, entonces, una estructura perfectamente ordenada compuesta por unidades tetraédricas y que se propagan ordenadamente en las tres dimensiones del espacio.



¿Qué pasa si juntamos varios carbonos con varios hidrógenos? Simplemente se formará una cadena de carbonos en la que dos vértices se unen a carbonos y los otros dos a hidrógenos. Podemos visualizar otras combinaciones. Pero lo importante es que si tenemos varios carbonos e hidrógenos, será posible hacer cadenas rematadas por hidrógenos. Si sólo tenemos un carbono y varios hidrógenos, los hidrógenos en

cierta forma constituyen un remate y no puede extenderse la cadena. La razón, naturalmente, es obvia. El hidrógeno tan sólo tiene un electrón que compartir. Si se quiere, ¡tan sólo tiene una valencia! Por el otro lado, el carbono tiene cuatro electrones para compartir, lo que en términos de valencia quiere decir que tiene cuatro.

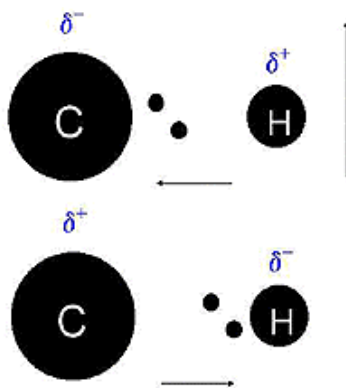
Observemos la situación del compuesto más simple que representamos con la fórmula  $\text{CH}_4$  y que conocemos con el nombre de metano. Si entre el carbono y cada hidrógeno se encuentran dos electrones, podemos claramente entender en qué consiste la fuerza de unión, o fuerza de enlace. En efecto, cada uno de los núcleos atómicos atrae a los dos electrones que se encuentran entre ellos. Es como si dos personas tiraran al tiempo de los brazos de una tercera persona en direcciones opuestas. Claramente podemos entender que ahora entre esas dos personas se establece un enlace a través de la fuerza que cada una hace sobre la tercera persona.



Cuando consideramos el espacio en el que con mayor probabilidad se podrían encontrar los dos electrones que enlazaban los protones de la molécula de hidrógeno llegamos a la conclusión de que debería ser en el centro del eje entre los dos protones. ¿Será lo mismo entre el protón de un hidrógeno y el núcleo de carbono que contiene 6 protones y cuya carga será, por tanto, seis veces mayor? A primera vista diríamos que no. Que la fuerza ejercida por seis protones tiene que ser muy superior a la ejercida por uno. Sin embargo, tenemos que tener en cuenta que entre los electrones de enlace y el núcleo del carbono se encuentran dos electrones en un orbital esférico cuyo centro es precisamente el núcleo del carbono. El campo eléctrico ejercido por estos dos electrones constituye una especie de mampara, de biombo, que disminuye la fuerza positiva del núcleo. El resultado es que la fuerza ejercida por el protón del hidrógeno sobre los dos electrones de enlace y la ejercida por el núcleo del carbono es aproximadamente igual, lo que hace que, a pesar de la diferencia de carga de los núcleos, los electrones de enlace se encuentren en un espacio aproximadamente en el centro del eje que los une.

Continuemos con nuestro experimento mental. Si en cualquier momento del tiempo paramos el movimiento de los electrones, lo más probable es que los encontremos en el medio del eje que conecta los dos núcleos. Pero, ¿será siempre así? ¿Qué pasa si los volvemos a parar un instante después?. Es lógico esperar que no sigan en el medio entre los núcleos, pues esto implicaría que los electrones estarían estacionarios, y esto está en contradicción con todo lo que conocemos. Por tanto, es forzoso concluir que se habrán movido del centro hacia uno de los dos núcleos. Si uno de los electrones se acercaba a un núcleo mientras que el otro se acercaba al otro núcleo cuando interrumpimos su movimiento, observaremos que la carga en exceso que puede extenderse a partir del núcleo más externo, no sufrirá un cambio muy grande. Pero si, por el contrario, los dos electrones se estaban dirigiendo a uno de los núcleos al mismo tiempo, será claro que el exceso de carga positiva alrededor de dicho núcleo se reducirá mientras que la carga positiva alrededor del otro se hará mayor. En ese caso podemos ver que el sistema estará polarizado, y habrá un exceso de carga positiva sobre un núcleo, al que damos el nombre de  $\delta^+$  mientras que el otro núcleo tendrá un exceso de carga negativa, o lo que es lo mismo, un defecto de carga positiva, que denominaremos  $\delta^-$ .

Echemos a andar de nuevo a los electrones y parémoslos de nuevo un momento después.



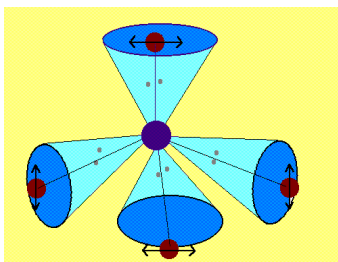
Lo más probable es que ahora encontremos los electrones cerca del otro núcleo. Y en este caso, la polaridad del sistema se habrá invertido: ¡el núcleo que antes era  $\delta^+$  será ahora  $\delta^-$ , mientras que el otro será  $\delta^+$ ! Si continuamos con este ejercicio, nos encontraremos con que la polaridad del sistema cambiará continuamente en forma casi que pulsátil. Decimos entonces que el enlace es un dipolo pulsátil, un dipolo variable o un dipolo instantáneo, ya que en el próximo instante cambiará su polaridad.

### Movimiento vibracional

En nuestro experimento mental, hasta el momento, hemos mantenido los núcleos inmóviles mientras que hemos dejado que los electrones se muevan en sus respectivos orbitales. Aunque dada la diferencia de masa entre protones y electrones esto es legítimo, no podemos desconocer que los núcleos también estarán dotados de movimiento.

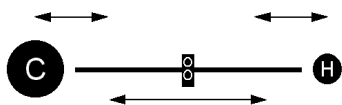
Volvamos a nuestros experimentos mentales y consideremos ahora que la atracción entre núcleos y electrones es similar a una banda de caucho. Fijemos el extremo de una banda a un núcleo y el otro extremo al par de electrones y fijemos la otra banda entre el otro núcleo y el mismo par de electrones. Se podrá, entonces, ver que hay un enlace entre un núcleo y otro a través de la atracción de cada núcleo por los electrones compartidos.

Pero, además, podremos observar que el enlace es elástico. Que al moverse los núcleos, éstos se acercarán y se alejarán, sin que, sin embargo, puedan separarse el uno del otro. A este movimiento de un núcleo en relación con el otro, le llamaremos movimiento vibracional y es propio de cualquier enlace entre dos núcleos.



Consideremos ahora no un enlace, sino toda la molécula de metano. En este caso los enlaces entre el núcleo de carbono y los protones del hidrógeno salen del carbono hacia los cuatro vértices de un tetraedro en los que se encuentran los hidrógenos. Será fácil imaginarnos que las bandas de caucho se estiran y se encogen cada una con un ritmo similar a la de las otras pero independiente e incoordinadamente de las otras. Pero es más: como las bandas están todas fijadas

al carbono que es el núcleo central, con sitios de implantación que están a  $109^\circ$  el uno del otro, los extremos de las bandas unidas al hidrógeno podrán desplazarse alrededor de los vértices del tetraedro, describiendo conos como los que aparecen en la figura.



Este movimiento vibracional tiene, sin embargo, una limitación: En efecto, recordemos que cada núcleo es un centro de carga positiva, mientras que los electrones son centros de carga negativa. Por consiguiente, los núcleos de

carga similar tendrán que estar lo más alejados el uno del otro. Esto hará que, en promedio, los hidrógenos se encuentren en los vértices del tetraedro, sin estar limitados a ellos. Si en su movimiento normal los hidrógenos se acercan instantáneamente, durante ese instante esa región de la molécula tendrá un exceso de carga positiva mientras que el resto de la molécula, tendrá un defecto de positividad, o sea, será parcialmente negativo. De esta manera, una molécula tan simétrica como el metano será durante un instante un dipolo, cuya polaridad cambiará también, en el siguiente instante.

¿Qué consecuencia tiene la existencia de estos dipolos instantáneos? En nuestro experimento mental coloquemos otra molécula de metano a una corta distancia de la que hemos venido considerando. Observaremos que la segunda molécula se comporta también como un dipolo instantáneo, independiente de la primera. Acerquemos las moléculas ahora hasta un punto en el que la carga fraccionaria de un dipolo pueda ser sentida por el otro dipolo. En ese momento pueden ocurrir dos cosas: a) que los dipolos se encuentren enfrentados con la misma carga, es decir dos  $\delta^+$  o dos  $\delta^-$  uno frente al otro. En ese caso habrá repulsión y las moléculas tratarían de alejarse la una de la otra. b) Que el  $\delta^+$  de una se encuentre enfrentado al  $\delta^-$  de la otra. Este caso es muy interesante, pues se establecerá una atracción entre las dos moléculas que tratará de hacerlas mantenerse como pareja. Pero más llamativo aún será que esta atracción ¡“congele” el dipolo! Es decir, ahora el dipolo que cambiaba polaridad de un instante al siguiente se mantiene en forma casi permanente. Decimos entonces que es un dipolo inducido.

Volvamos a las condiciones de la tierra. En la ventana de temperatura entre  $0^\circ\text{C}$  y  $70^\circ\text{C}$  todas las moléculas están dotadas de energía que se manifiesta como movimiento. El total del movimiento de todas las moléculas de un sistema es lo que conocemos como el calor del sistema. Y este calor se manifiesta en términos medibles como una temperatura.

El movimiento de las moléculas de un sistema a una determinada temperatura se puede resolver en tres componentes: 1) el translacional, es decir un movimiento rectilíneo de la molécula que se mantiene hasta cuando las moléculas choquen con otras o contra las paredes del recipiente, o, en el caso de la atmósfera, hasta donde lo permita la fuerza de

gravedad. 2) El rotacional, o movimiento de cada molécula alrededor de cualquiera de sus ejes de simetría y 3) el vibracional, que discutimos más arriba. El conjunto de estos tres movimientos de todas las moléculas de un sistema es la energía total o calor de ese sistema.

Para el caso de un sistema compuesto de moléculas de metano a una temperatura entre 0° y 70° C el conjunto de movimientos de cada molécula hará imposible que las moléculas se aproximen suficientemente una a otra, excepto en casos de colisión que, debido a la velocidad, será totalmente elástica sin que haya posibilidad de que se establezcan interacciones. Sin embargo, si disminuimos la energía del sistema, llegará un momento en que, si la discusión que hemos hecho es correcta, las moléculas se podrán aproximar lo suficiente para permitir el establecimiento de uniones entre dipolos instantáneos y, por ende de dipolos inducidos. En ese momento se restringirá casi totalmente el movimiento translacional, y se dificultará el movimiento rotacional con lo que se ordenarán las moléculas y tendremos el estado líquido.

Esto, efectivamente, ocurre a 112° K. Una mayor restricción a todos los movimientos con un ordenamiento mayor del sistema y tendremos un sólido, lo que ocurre a 90° K. Fritz London, utilizando métodos diferentes a los nuestros, llegó a la conclusión de que las fuerzas de unión entre estas cargas fraccionarias eran directamente proporcionales al producto de la magnitud de las cargas e inversamente proporcionales a la cuarta o quinta potencia de la distancia entre ellas:

$$F = k (\delta^+ \cdot \delta^-) / r^{4,5}$$

Por esta razón, a estas fuerzas muy débiles individualmente, pero que integradas en relación con todo un sistema son tan fuertes que llegan hasta hacerle tomar el estado líquido o sólido a temperaturas bajas, se les llama fuerzas de London.

Como se puede apreciar, la ecuación tiene la misma forma que la ecuación de Coulomb que relaciona la fuerza de atracción o repulsión de dos cargas con la magnitud de las mismas y con la distancia entre ellas. Sin embargo, en este caso las cargas son muy débiles, lo que hace que la fuerza se reduzca con el cuarto o quinto exponente de la distancia. Por consiguiente, la fuerza será efectiva sólo a distancias muy pequeñas entre dipolos. Por eso, a medida que aumenta el tamaño de la cadena, como lo discutimos más abajo, tanto la magnitud como el número de posibles dipolos instantáneos aumenta y esto se refleja en aumentos en el punto de fusión y el punto de ebullición.

### **Moléculas más grandes**

El hecho de que el carbono tenga cuatro electrones no apareados en los vértices de un tetraedro permite que, a diferencia de lo que ocurre con cualquier otro elemento excepto el silicio, se puedan formar cadenas de átomos de carbono de longitudes bastante grandes.

Para el caso de la biosfera nos interesan dos tipos de cadenas: las lineales y las cíclicas. En el primero de los casos, la cadena se puede considerar conformada por eslabones de un carbono unido a dos hidrógenos, CH<sub>2</sub>. La cadena estará rematada en un extremo por un CH<sub>3</sub>, mientras que el otro frecuentemente es un grupo carboxílico, libre o en

combinación con un alcohol. Sin embargo, en la naturaleza y como resultado de la acción del tiempo, la presión y la temperatura sobre plantas de hace millones de años, también se encuentran cadenas de  $\text{CH}_2$  rematadas en ambos extremos por  $\text{CH}_3$ . Examinemos estos compuestos que llamamos hidrocarburos, ya que presentan propiedades interesantes que explican el comportamiento de algunas moléculas biológicas.

## Hidrocarburos

Si unimos dos carbonos a través de dos de sus electrones no apareados y el resto de los electrones no apareados de estos átomos los apareamos con el electrón de seis átomos de hidrógeno tendremos el etano. Si volvemos a nuestro experimento mental, podremos observar cómo los electrones de cada uno de los enlaces C-C o C-H se podrán acercar a uno u otro de los núcleos, habrá vibración en cada uno de ellos y habrá rotación de cada uno de los núcleos en relación con el otro. Vale la pena observar que en el caso de los carbonos, cuando uno rota en relación con el otro, llevará consigo a los tres hidrógenos que están unidos a él. Por consiguiente, para efectos de rotación, podremos considerar a cada carbono con sus hidrógenos como una sola unidad.

El mayor número de pares de electrones que se mueven entre núcleos nos da mayores posibilidades de tener dipolos instantáneos más fuertes. Si esto es cierto, las distancias entre los dipolos podrán ser mayores que en el caso del metano para que se establezcan interacciones y dipolos inducidos. Esto se puede observar en la tabla siguiente en la que se consigna el nombre, la temperatura de fusión y la de ebullición de hidrocarburos hasta de 20 carbonos.

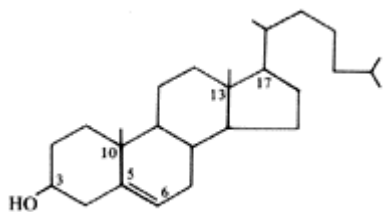
Nombre	Número de carbonos	Punto de Fusión °C	Punto de Ebullición (°C)
Metano	1	-182.5	-161.6
Etano	2	-183.3	-88.6
Propano	3	-189.7	-42.1
Butano	4	-138.3	-0.5
Pentano	5	-129.8	36.1
Hexano	6	-95.3	68.7
Octano	8	-56.8	125.7
Decano	10	-29.7	174.0
Dodecano	12	-9.6	216.2
Tetradecano	14	5.5	253
Hexadecano	16	18	287
Eicosano	20	36.7	342.7

De acuerdo con esta discusión, podemos predecir que a medida que la cadena se hace más y más larga, la posibilidad de tener más dipolos instantáneos se incrementa y con ese incremento aumentará la temperatura a la cual el hidrocarburo es líquido o sólido. En efecto, la gasolina está compuesta de cadenas entre cinco y dieciséis carbonos y es líquida a temperaturas corrientes en nuestro medio. Sin embargo, incrementos en la temperatura hacen que las moléculas se separen unas de otras y la sustancia se volatilice. Es esta propiedad, precisamente, la que se aprovecha en los motores de explosión.

Si las cadenas son aún más largas, podemos tener sólidos como el asfalto en el que el número de dipolos inducidos es de tal magnitud que las cadenas se ordenan completamente y mantienen su cohesión aún a temperaturas altas.

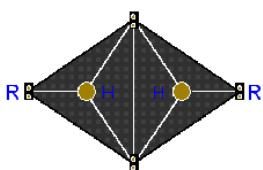
Hasta el momento hemos relacionado el estado físico de una sustancia carbonada con la posibilidad de formar dipolos instantáneos. Más adelante veremos que esta consideración básica está modificada por cuestiones estéricas, es decir, por la forma como las moléculas ocupan espacio.

### Compuestos cíclicos



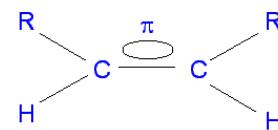
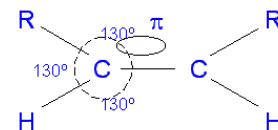
En ocasiones, cadenas de cinco a nueve carbonos pueden dar anillos o cadenas cíclicas. Algunos hidrocarburos cíclicos tienen interés biológico, tales como los esteroides y los que tienen sustituciones de OH en vez de uno de los H, en cuyo caso tendremos carbohidratos. En este momento no insistiremos sobre este punto, aparte de mencionarlo.

### Dobles enlaces

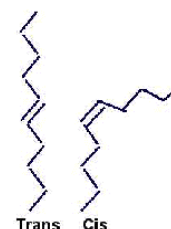


Una propiedad muy interesante que tienen los electrones del carbono es que, en ocasiones, dos electrones de un carbono pueden aparearse con dos del siguiente carbono. Es como si una arista de un tetraedro se hubiera fundido con una arista del otro tetraedro. De hecho, algunos libros nos dan esta interpretación que en una cosa es cierta: en que desaparece la rotación libre de los

dos carbonos, y ahora ambos rotan como una unidad. Sin embargo, esta interpretación es simplista, ya que de ser cierta, implicaría que los dos enlaces son equivalentes, y que se mantienen los ángulos entre los sustituyentes del carbono. De hecho, la situación es diferente. El enlace principal entre los núcleos, o enlace  $\sigma$ , está constituido por los dos electrones que se encuentran aproximadamente en el medio del eje que une a los dos carbonos. Los otros dos electrones que se aparearon y que llamaremos  $\pi$  lo hacen en un espacio que se encuentra por encima o por debajo del enlace  $\sigma$ . Estos dos electrones se encuentran forzados fuera de su espacio natural, lo que da al sistema una estructura planar, no tetraédrica, en la que los seis elementos del sistema se encuentran en un plano y a  $130^\circ$  el uno del otro.

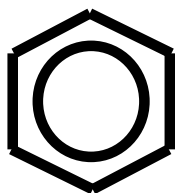


Como resultado de esta disposición tenemos dos consecuencias muy importantes. La primera, que al encontrarse los electrones en situación de tensión, serán fácilmente atacables. Esto es, un enlace doble es mucho más reactivo que un enlace  $\sigma$ , ya que al hacer que estos electrones se separen para aparearse con otros en su forma normal de tetraedro, se aliviará la tensión.



La segunda es que, debido a que el enlace rota como una unidad, aparecerán dos isómeros de posición totalmente estables: el *cis* y el *trans*. En una cadena hidrocarbonada el enlace *trans* permite que se mantenga aproximadamente el eje de la cadena. Lo mismo no puede ocurrir con el *cis*, que obliga a un cambio forzoso de dirección.

En el caso de las moléculas biológicas con cadenas hidrocarbonadas largas, tales como los ácidos grasos naturalmente sólo se presentan dobles enlaces *cis*. El cambio de dirección en el eje de la cadena impide que, en este caso, haya un empaquetamiento ordenado de las moléculas lo que hace que a temperatura corporal tengan lo que podríamos llamar un estado semisólido.



De particular interés son los dobles enlaces que se presentan en cadenas cíclicas cuyo prototipo es el benceno. Como en el caso de cadenas abiertas, el enlace principal entre carbonos es el  $\sigma$ . En este caso, sin embargo, los electrones  $\pi$  no se encuentran circunscritos a un espacio entre dos núcleos de carbono, sino que se pueden mover casi que libremente en una franja que se encuentra por encima o por debajo del anillo.

Aquí debemos resaltar también unas características importantes del sistema. En primer lugar, el anillo será plano. Y podemos predecir que todo anillo con dobles enlaces conjugados como en el benceno, será plano. Esta característica es importante cuando hablemos de los aminoácidos triptófano, fenilalanina y tirosina, que por razones que se verán más adelante, podemos también decir que serán insolubles en agua. Una segunda característica es que interactúan con las ondas visibles del espectro electromagnético. Compuestos con tres dobles enlaces conjugados como el benceno, absorben en el ultravioleta, mientras que sistemas más complejos tales como el anillo tetrapirrólico de la hemoglobina o de la clorofila, absorben en el visible. Las longitudes de onda no absorbidas son reflejadas, y por eso es roja la sangre y verde la vegetación.

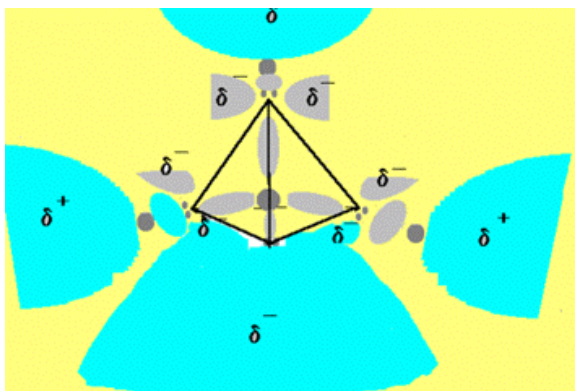
## Nitrógeno

Si al núcleo del carbono le añadimos un protón y un neutrón y para compensar la mayor carga positiva nuclear añadimos un electrón periférico, tendremos un nuevo elemento: el nitrógeno.

La adición de estas tres partículas no nos cambia fundamentalmente la geometría del sistema, aunque sí su masa y la distribución de cargas. En efecto, seguiremos teniendo un par de electrones con espines diferentes en el primer nivel energético, pero ahora habrá cinco electrones en el segundo nivel. Manteniendo la geometría tetraédrica, esto hará que en tres vértices del tetraedro haya un electrón no apareado, y por consiguiente, ávidos de encontrar pareja, mientras que en el otro vértice se encontrarán dos electrones apareados, con espines diferentes.

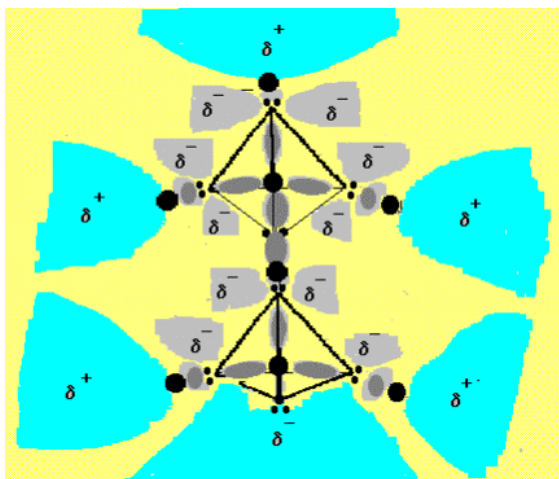
Volvamos a nuestros experimentos mentales y observemos un átomo aislado de nitrógeno. Como la carga nuclear es mayor, la distancia de los electrones de los dos niveles al núcleo será menor. Por consiguiente, el radio del átomo de nitrógeno será menor que el del carbono. Observemos ahora los electrones del segundo nivel. El

espacio en el que con mayor probabilidad encontraremos cualquiera de los electrones no apareados es el vértice de un tetraedro y la distancia de ese vértice al núcleo es equivalente en los tres casos. Pero, ¿donde encontraremos con mayor probabilidad al par de electrones apareados? Obviamente, deberá ser en el cuarto vértice del tetraedro. Sin embargo, no es así. Estos dos electrones, con dos unidades de carga bastante localizada en una región del espacio serán atraídos más fuertemente por las siete unidades de carga localizadas en el núcleo, muy de acuerdo con la ley de Coulomb. Por consiguiente, estos dos electrones se encontrarán substancialmente más cerca del núcleo que cualquiera de los otros tres, dando una geometría de tetraedro truncado.



Siguiendo con nuestro experimento mental, acerquemos ahora tres átomos independientes de hidrógeno al átomo de nitrógeno. El electrón de cada átomo de hidrógeno se apareará inmediatamente con el electrón no apareado que se encontraba en cada uno de los tres vértices del tetraedro del nitrógeno. Podemos, entonces, observar un tetraedro truncado mucho más grande en el que tendremos ahora en cada uno de los tres vértices un protón, y en el vértice truncado un par de electrones.

Si acercamos una carga de prueba negativa a cualquiera de los tres vértices ocupados por un protón, la carga sentirá una atracción real equivalente a una fracción de carga positiva, que podemos escribir como  $\delta^+$ , mientras que si acercamos la misma carga de prueba al vértice truncado donde se encuentra el par de electrones, sentiremos una repulsión cuya fuerza podemos escribir como  $\delta^-$ . Esta molécula, que corresponde a la sustancia llamada amoníaco, y que podemos escribir como  $\text{NH}_3$ , es claramente un dipolo cuya orientación no cambia con el tiempo. Es, por tanto, un dipolo permanente. Toda vez que el dipolo es permanente, su fuerza puede ser medida cuantitativamente y expresada como una fracción de una unidad de carga, tanto en las partes  $\delta^+$  como en la parte  $\delta^-$ . En la práctica esto es muy difícil ya que podemos medir la carga en el extremo, pero el  $\delta^+$  será la suma de la contribución de cada uno de los tres protones, y no es posible definir la contribución exacta de cada uno de ellos.

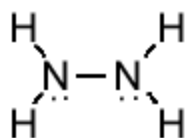


Acerquemos ahora otra molécula de  $\text{NH}_3$  a la que hemos venido considerando. Esta segunda molécula se orientará inmediatamente en forma tal que cualquiera de sus protones interactuará con el par de electrones del vértice truncado. Esta interacción hará que el par de electrones se alejen del núcleo de nitrógeno propio, pero sin que lleguen a estar en el medio del eje entre el protón y el núcleo de N. Como podemos observar, se habrá formado un enlace entre un núcleo de nitrógeno y un protón que ya estaba unido a través de un enlace  $\sigma$  al otro núcleo de nitrógeno.

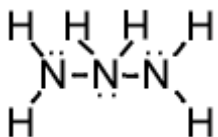
Observemos que el nuevo enlace es, en esencia, lo mismo que un enlace  $\sigma$ . En efecto, hay dos núcleos que al ser atraídos por el mismo par de electrones forman un sistema que mantiene juntos a los elementos del sistema. Sin embargo, se diferencia del enlace  $\sigma$  en que el par de electrones se encuentra mucho más cerca, en promedio, del núcleo de N que del núcleo de H y que este último ya tiene formado un campo de atracción permanente con el par de electrones que comparte con el otro N y, por consiguiente, la fracción de carga disponible para interactuar con un segundo campo negativo será menor. Como consecuencia de lo anterior, el nuevo enlace, que algunos textos llaman *coordinado covalente*, será mucho más débil que un enlace  $\sigma$ . Esto, a su vez implica que si, como en la naturaleza, tenemos muchas moléculas y no sólo dos, como en nuestro experimento mental, y si el sistema tiene una determinada energía interna que haga que la mayor parte del movimiento translacional esté restringido, entonces observaremos que debido al movimiento rotacional de las moléculas estos enlaces se rompen y se rehacen a velocidades altísimas con la misma molécula o con una molécula que la reemplace y el sistema será líquido.

A pesar de que el par de electrones apareados del nitrógeno se puede compartir con núcleos diferentes al del H, en la mayor parte de los casos que nos interesan es precisamente con el protón de un enlace  $\sigma$  con el que se establece el nuevo enlace. Este enlace se hace, en últimas, entre tres y no entre dos núcleos, siendo, en cierta forma, el H el elemento de unión entre los otros dos núcleos. Por esta razón, llamaremos a este enlace, *enlace de hidrógeno*.

Como veremos posteriormente, el enlace de hidrógeno también se puede establecer entre oxígenos así como entre oxígenos y nitrógenos. Cuando van der Waals estudió el comportamiento de gases reales observó que a bajas temperaturas o a altas presiones no se comportaban como lo predecía la ley de Boyle y Mariotte, y que esto se podía explicar si se presumía que existían unas ciertas fuerzas de atracción entre las moléculas. Estas fuerzas de atracción, que se han llamado fuerzas de van der Waals, son debidas a dipolos permanentes como el que observamos en el caso del  $\text{NH}_3$ .



Volvamos a nuestros experimentos mentales en el espacio interestelar. Si tuviéramos una cantidad de nitrógenos e hidrógenos ¿sería posible hacer una cadena de hidronitruros análoga a la de hidrocarburos?.

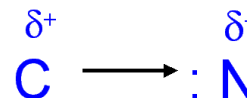


Juntemos dos N's. Podremos establecer un enlace  $\sigma$  entre los dos y en cada N nos quedan dos electrones no apareados y un par de electrones apareados. Los no apareados podemos aparear con los de hidrógenos, y así tendremos  $\text{H}_2\text{N-NH}_2$ . Esta molécula, que podríamos llamar diamina, tendrá un fuerte momento dipolar y tratará de compartir sus dos pares de electrones apareados con otras moléculas de diamina. Añadamos un tercer  $\text{NH}_2$ . Deberíamos tener  $\text{H}_2\text{N-NH}_2\text{-NH}_2$ .

Sin embargo, esta molécula tendría tal cantidad de carga negativa, debido a los electrones apareados de cada núcleo, localizada en un espacio demasiado pequeño que la hace no viable. Por consiguiente, no es posible tener cadenas hidronitrogenadas a la manera de las hidrocarbonadas.

Sin embargo, ¿será posible tener un doble enlace entre dos nitrógenos?. La respuesta es claramente sí. Y la molécula resultante,  $\text{HN=NH}$ , será altamente reactiva, como es fácil de imaginar.

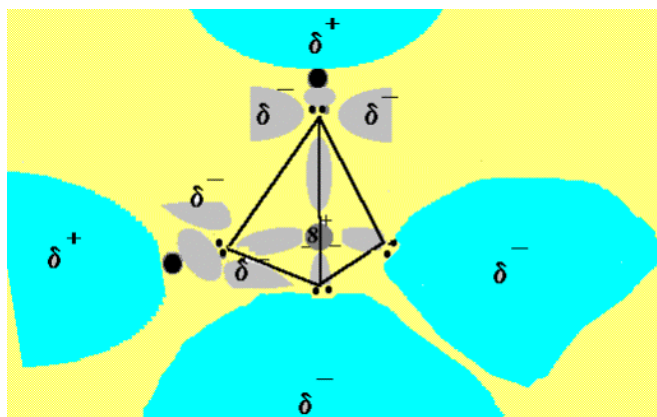
Coloquemos ahora C, N y H en proporciones adecuadas para darnos una molécula de  $\text{CH}_3\text{-NH}_2$ , metilamina. Observemos los enlaces  $\sigma$  C-H y N-H. No hay nada diferente a lo normal en ellos: el par de electrones se encuentra más probablemente en el centro del eje que une a los dos núcleos, aunque moviéndose a ambos lados del centro, según observamos más arriba, produciendo dipolos oscilantes instantáneos. Miremos, ahora, el enlace C-N. Aquí las cosas cambian. El núcleo del C tiene seis cargas positivas mientras que el del N tiene siete. Por consiguiente, el N ejercerá un campo de fuerza mayor que el C y atraerá, por tanto, los electrones del enlace hacia él. El resultado será que el espacio donde con mayor probabilidad encontremos al par de electrones de enlace no sea en el centro del eje que une los núcleos, sino más cerca del N que del C. En otras palabras, el enlace C-N estará polarizado permanentemente y el nitrógeno será parcialmente negativo, mientras que el C será parcialmente positivo. Esta es la característica que conocemos como electronegatividad y que nos permite predecir que para el caso de los elementos del mismo período, la electronegatividad aumenta con el número de protones del núcleo. Por eso el fluor es más electronegativo que el oxígeno, el cual es más que el nitrógeno y éste más que el carbono. De hecho, la electronegatividad del núcleo del fluor es tan grande, que fácilmente se apodera del electrón más externo de átomos que tienen solo uno o dos electrones periféricos como el Li, el Na, el K, o el Ca. Esta polarización de los enlaces, o electronegatividad, será muy útil para entender porqué ocurren las reacciones bioquímicas y poder predecirlas. A continuación aparece la electronegatividad de algunos átomos. Como se puede observar, la electronegatividad es, en cierta forma, la medida cuantitativa de la fuerza de atracción de un núcleo sobre los electrones de enlace y nos muestra la polarización del enlace entre diferentes átomos. Volveremos sobre este punto en el siguiente capítulo.



Atomo	Electronegatividad	Atomo	Electronegatividad
Fluor	4.0	Cobre	1.9
Oxígeno	3.5	Hierro	1.8
Cloro	3.0	Cobalto	1.8
Nitrógeno	3.0	Níquel	1.8
Bromo	2.8	Molibdeno	1.8
Azufre	2.5	Zinc	1.6
Carbono	2.5	Manganeso	1.5
Yodo	2.5	Magnesio	1.2
Selenio	2.4	Calcio	1.0
Fósforo	2.1	Litio	1.0
Hidrógeno	2.1	Sodio	0.9
		Potasio	0.8

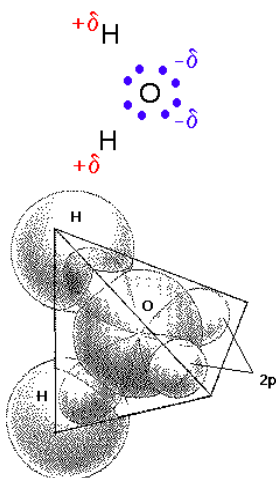
## Oxígeno

Si al núcleo del N le añadimos un protón y un neutrón y luego colocamos un electrón periférico adicional tendremos un nuevo elemento, el oxígeno. Como lo discutimos en el caso del N, la geometría básica del elemento no variará fundamentalmente con el



aumento de masa y de carga eléctrica. Sin embargo, el nuevo electrón necesariamente tendrá que aparearse con uno de los electrones solitarios con espín contrario que se encuentren en cualquiera de los tres vértices del tetraedro en donde se encuentra un solo electrón.

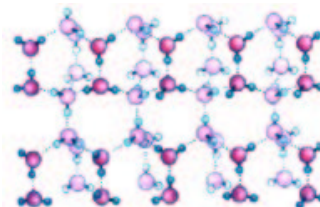
Nuevamente, como lo discutimos en el caso del nitrógeno, el aumento en la carga nuclear no solamente reducirá el diámetro del átomo en relación con el del N, sino que hará que ambos pares de electrones apareados se encuentren mucho más cerca del núcleo que los electrones no apareados. En estas condiciones tendremos un tetraedro doblemente truncado.



Volviendo a nuestro experimento mental, añadamos hidrógeno. Sólo dos hidrógenos se podrán unir como aparece en la figura, para dar una sustancia por demás conocida:  $H_2O$ .

La observación somera de esta molécula nos mostrará que es un doble dipolo permanente. Como los vértices son equivalentes, dos cualesquiera serán parcialmente negativos mientras que los dos opuestos serán parcialmente positivos. Esto permite medir la fuerza total del dipolo que es igual a 0.66 unidades electrostáticas. Podemos, pues, asignar una magnitud de carga a cada extremo del dipolo, igual a las  $2/3$  partes de la carga de un protón o de un electrón y ésta es una cantidad de carga respetable. Sin embargo, es conveniente resolver esa carga en las diferentes direcciones del espacio. Para hacerlo, podemos suponer en términos generales que la carga positiva es la sumatoria de las cargas parciales de los protones y que lo mismo es cierto de las cargas de los electrones apareados. Entonces, podemos presumir que en cada vértice del tetraedro del oxígeno existirá una carga equivalente a 0.33 unidades electrostáticas, en promedio. Nótese que decimos, en promedio, porque el movimiento de los electrones y los núcleos hará que esta carga varíe en cada caso particular.

Siguiendo nuestro experimento mental, añadamos más moléculas de agua. Será obvio que las moléculas se atraerán en proporción directa al producto de sus cargas. Y cada molécula tendrá cuatro cargas que podrán interactuar con una de las cuatro de otras cuatro moléculas. Será fácil visualizar que estas moléculas se ordenarán como si uno fuera colocando tetraedros en el espacio, uno sobre otro, en todas las direcciones, y los vértices tuvieran una goma que los pegara uno a otro.



Los tetraedros, sin embargo, no serán totalmente simétricos, como sí lo son cuando unimos átomos de carbono uno a otro de esta misma forma para darnos un diamante. Afortunadamente para la vida, en la ventana de temperatura del planeta tierra, los electrones apareados que forman enlaces de hidrógeno con los protones de la molécula aledaña se encuentran más cerca del núcleo del oxígeno que del protón. Esto hace que este enlace sea más largo, y por consiguiente, más débil. Y eso permite que entre  $0^\circ$  y  $100^\circ$ , el agua sea líquida. Como en el caso de las moléculas de  $NH_3$ , a temperaturas más bajas la energía de las moléculas del sistema se manifestará principalmente en movimientos vibracionales y rotacionales, estando los traslacionales fuertemente restringidos. Y los enlaces de hidrógeno entre moléculas de agua se romperán y

reformularán a velocidades cercanas a 100 millones de veces por segundo. En nuestro experimento mental podemos ver cada molécula como un tetraedro doblemente truncado que tiene una especie de goma en cada uno de sus vértices. Si alargamos el tiempo en forma tal que podamos apreciar todos los movimientos, veríamos que las moléculas rotarían no en una forma continua y uniforme, sino a saltos, deteniendo su rotación un instante mientras se forma un enlace de hidrógeno para reasumirla cuando éste se rompa y así sucesivamente. La molécula no rotará en el mismo sitio todo el tiempo. Como en una sala de baile una pareja se desplaza rotando mientras que el espacio que ocupaba un instante antes es ocupado ahora por una nueva pareja, conjuntos de moléculas de agua, y aún moléculas individuales dentro del conjunto, van rotando y desplazándose de sitio a sitio, llenando de inmediato cualquier espacio que deje libre un conjunto de moléculas que se desplace a otro espacio. Es esta danza continua en el tiempo y el espacio lo que constituye el estado líquido del agua o del amoníaco. Es lo que le da sus propiedades; lo que permite que adopte la forma de la vasija en que se encuentra; lo que permite que si hay dipolos con carga mayor que 0.3 unidades electrostáticas y un tamaño adecuado, estos dipolos se puedan mezclar íntimamente con las moléculas del agua para dar una solución verdadera; o lo que permite que si el dipolo es suficientemente fuerte, algunas moléculas de agua se orienten permanentemente alrededor de él para darnos verdaderos sistemas que se desplazan como conjuntos semipermanentes. Algunos autores describen el agua como un cristal líquido, es decir, que tiene una estructura definida, pero siempre cambiante, en la que no caben los desplazamientos rectilíneos a lo largo de espacios grandes como ocurre en el estado gaseoso.

La velocidad de desplazamiento de los conjuntos rotantes del agua depende de la temperatura. Por debajo de 0° C estos desplazamientos serán menores y los enlaces de hidrógeno serán cada vez más cortos en forma tal que a temperaturas muy bajas el ordenamiento será tal que nos aproximemos a la estructura y a la misma dureza del diamante. A temperaturas cercanas a los 100° C y a una atmósfera de presión atmosférica, los movimientos de estos conjuntos se hacen cada vez más fuertes hasta que llega un momento en el que el conjunto escapa del sistema, adquiriendo el movimiento translacional la primacía. En ese momento tenemos vapor de agua. Nótese que en el vapor de agua las moléculas de agua no se encuentran individualmente libres, sino que se mantienen como conjuntos de moléculas que se desplazan rectilíneamente como una unidad. O sea, el vapor de agua no es un gas. Para obtener el gas agua, es decir para romper todas las atracciones entre moléculas de agua y dejar que se comporten como unidades individuales, se necesita superar los 700° C.

Es esta propiedad la que le permite que la vida, como la conocemos, se haya desarrollado en el sistema acuoso de la tierra. Lo que permite que la evaporación de los mares y de los cuerpos de agua, en forma de nubes, pueda volver luego como lluvia a dar sustento a las plantas y éstas a los animales. Es tan importante, que dedicaremos luego un capítulo entero para explorar aquellas propiedades que la hacen el escenario de la vida.

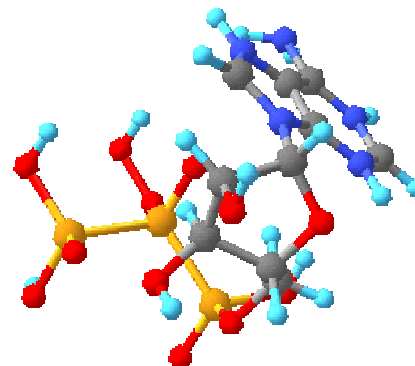
### ***Unión del oxígeno consigo mismo***

¿Qué pasa si ahora, en vez de hidrógenos, acercamos un átomo de oxígeno a otro? En primera instancia podremos observar que, debido a que cada uno de los oxígenos tiene dos electrones no apareados y cuatro apareados, estos últimos en dos vértices truncados del tetraedro, uno de los electrones no apareados de un oxígeno se apareará inmediatamente con uno de los electrones no apareados del otro oxígeno dándonos un

enlace  $\sigma$ . Esto, en cierta forma, acercará los electrones no apareados que quedan en cada uno de los oxígenos, haciendo que éstos también se apareen para darnos un enlace  $\pi$ . La geometría del sistema resultante es la de una molécula planar, en cierta forma similar a la molécula de hidrógeno que habíamos visualizado, pero que tiene unas características muy interesantes: En primer lugar, en cada uno de los extremos de la molécula encontraremos dos pares de electrones en un espacio que podríamos considerar como correspondiente a los dos vértices de un triángulo. Estos pares de electrones estarían en el mismo plano en el que se encuentran los núcleos. Estos pares de electrones, naturalmente tendrían un exceso de carga negativa,  $\delta^-$ , que irradiaría en el espacio y sería sentido por una carga de prueba que colocáramos a una distancia adecuada. En segundo lugar, entre los dos núcleos tendríamos un par de electrones en enlace  $\sigma$  normal, y un par de electrones cuya mayor probabilidad de localización estaría en un espacio por encima o por debajo del plano de los núcleos y, por consiguiente, muy fácilmente accesibles a otros campos electromagnéticos que se le pudieran acercar. A diferencia de lo que ocurre con un doble enlace entre dos núcleos de carbono, que como vimos más arriba, en los dos vértices de los triángulos resultantes tendrán otro núcleo con carga positiva, hidrógeno, carbono, etc., en el caso del oxígeno esos vértices estarán ocupados por pares de electrones apareados pero no compartidos con ningún otro núcleo. Esto hará que el campo negativo ejercido por estos pares de electrones haga tremendamente inestable la unión del par de electrones en enlace  $\pi$ .

¿Qué consecuencia práctica tiene esta disposición de la molécula? Será fácil comprender que si un sistema como el de la molécula de oxígeno se acerca a otro átomo o molécula que en alguna forma pudiera tener electrones no apareados, y en algunos casos, aún apareados por compartir, los electrones  $\pi$  violentamente tratarán de aparearse con esos electrones. Esto hace del oxígeno una especie de rebuscador de electrones que se encuentren, por cualquier razón, en condiciones no totalmente estables. Lo cual, a su vez, se traduce en el hecho de que el oxígeno tratará activamente de combinarse con otros elementos, aceptando electrones de ellos. Es a este proceso de aceptación de electrones a lo que se llama oxidación, por antonomasia. Y es debido a esta tendencia que la mayor parte del oxígeno se halle en combinación formando óxidos, de los cuales, el más importante para la vida es el agua.

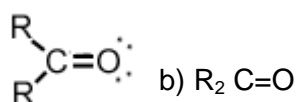
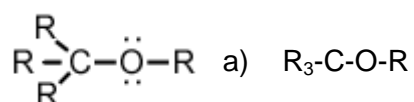
De hecho, la energía necesaria para sostener los procesos vitales, como toda la energía disponible en la tierra, viene en última instancia del sol, pero involucra un ciclo básico en el cual el oxígeno juega un papel primordial debido a las características que venimos discutiendo. En efecto, las células que contienen cloroplastos utilizan fotones provenientes del sol para romper el agua y darnos agentes reductores, es decir, donantes de electrones, que se combinarán con carbono para eventualmente darnos todas las moléculas propias de los seres vivos. Como subproducto del proceso se forma  $O_2$ , que a la temperatura de la tierra no tiene suficiente atracción por sí mismo y por consiguiente es un gas que se difunde en la atmósfera. Diferentes organismos llamados aeróbicos, dentro de los cuales están los animales, eventualmente tomarán ese oxígeno y le proporcionarán los electrones de dos átomos de hidrógeno para volver a hacer agua, completando de esta forma el ciclo. En el proceso, la energía lumínica del sol que se aprovecha en las plantas para dar compuestos reducidos finalmente llega hasta los animales en los que esos compuestos reducidos son oxidados, es decir, se les sustraen electrones que



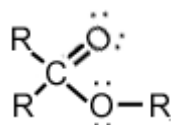
finalmente volverán por vías especiales al oxígeno. En cualquiera de los dos procesos se permitirá la formación de una molécula altamente energética, la adenosina trifosfato, bien conocida por su sigla, ATP, que será la moneda energética que animará todas las reacciones bioquímicas.

### *Combinación con carbono.*

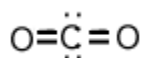
La combinación de oxígeno con carbono es fundamental para los procesos vitales. Los modos de combinación dependerán del número de los electrones no apareados del carbono que se combinen en un momento dado con el oxígeno. Desde este punto de vista podemos predecir que existirán los siguientes tipos de posibilidades:



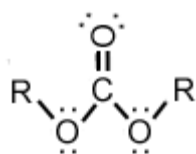
c)  $\text{R}_2\text{C O}_2\text{R}$



d)  $\text{C O}_2$



e)  $\text{R}_2\text{CO}_3$



donde R es otro átomo, generalmente C o H. ¿Cómo será la geometría de cada una de estas moléculas y qué consecuencias prácticas tendrá esa geometría?

Para responder esta pregunta necesitamos volver a nuestros experimentos mentales e imaginarnos la geometría de los elementos que intervienen: esfera para el hidrógeno, tetraedro para el carbono y tetraedro doblemente truncado para el oxígeno. Consideremos cada uno de los casos.

a) Examinemos el primer caso, haciendo que R sea hidrógeno. Tendremos entonces la molécula  $\text{CH}_3\text{OH}$ , metanol o alcohol metílico. En este caso tres de los electrones del carbono se habrán apareado con el electrón del hidrógeno y el cuarto con uno de los electrones no apareados del oxígeno. Por consiguiente, el carbono mantendrá su geometría tetraédrica. Por su parte, uno de los electrones no apareados del oxígeno se habrá apareado con uno del carbono, mientras que el otro se habrá apareado con el

electrón del hidrógeno. Sin embargo, ¿cómo afecta la probabilidad de encontrar pares de electrones en el espacio ocupado por la molécula el hecho de que el núcleo de oxígeno contenga 8 electrones, mientras que el del carbono sólo tenga 6?

Ya habíamos señalado que ambos núcleos tendrán a su alrededor un par de electrones apareados en un espacio esférico relativamente cercano al núcleo. El diámetro de la esfera correspondiente a los electrones 1s del oxígeno será, naturalmente, más pequeño que el de la esfera correspondiente a los mismos electrones del carbono. Sin embargo, su efecto de apantallamiento será menor ya que la fuerza positiva del núcleo de O es dos cargas más grande que el de C. Esto implica que en el espacio de la segunda esfera dentro de la cual se inscriben los tetraedros, la fuerza positiva del núcleo de oxígeno será muchísimo mayor que en el espacio correspondiente que rodea al núcleo de carbono. Como resultado de esto el par de electrones del enlace  $\sigma$  entre el carbono y el oxígeno será atraído más hacia el núcleo de O, que en esta forma adquirirá una carga parcial negativa,  $\delta^-$ , mientras que el carbono adquirirá una carga parcial positiva,  $\delta^+$ . De la misma manera, los electrones del enlace  $\sigma$  entre el oxígeno y el hidrógeno estarán un poco más cerca, en promedio, del núcleo de oxígeno que del núcleo de hidrógeno. Como resultado de lo anterior encontramos que, en general, los alcoholes se pueden considerar como una especie de *tripolo* permanente. Este tripolo estaría constituido por un polo positivo sobre el carbono, uno negativo sobre el oxígeno y otro positivo sobre el hidrógeno. Estamos conscientes que la palabra *tripolo* no es aceptada, pero para nuestros propósitos podemos entenderla como aquel tipo de geometría electromagnética en la que un núcleo fuertemente electronegativo está enlazado con otros dos núcleos de menor electronegatividad y, por consiguiente, atrae fuertemente los electrones que se encuentren en su órbita de influencia.

La consecuencia de una geometría tripolar como la descrita es que se puedan establecer interacciones relativamente fuertes entre dipolos que influyen en el estado físico de la sustancia. Como es de común observación, al haber cambiado uno de los hidrógenos del metano por un OH, como lo hemos hecho en este caso, convertimos una sustancia que era gas a temperatura ambiente a otra que es líquida, ya que las atracciones entre dipolos permiten la organización espacial de las moléculas. La existencia de estos dipolos también tendrá una importancia muy grande en la interacción que puedan tener con otras moléculas polares, por ejemplo, agua, como se verá más adelante.

Otro efecto muy importante de esta disposición espacial es que estos enlaces covalentes que por ser polares podríamos considerar asimétricos, son más débiles que los enlaces covalentes en los que los electrones se encuentran en promedio más hacia el centro del eje que une los dos núcleos enlazados. Esto hace que sean reactivos y puedan participar en reacciones químicas cuando se dan las condiciones adecuadas.

En este sentido, es muy ilustrativo observar qué pasaría si el R que se une al oxígeno es, en vez de hidrógeno, otro  $\text{CH}_3$ . Tendríamos, entonces, la molécula  $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ , éter metílico. Si miramos la forma como se encontrarían los electrones alrededor del núcleo de oxígeno, observaríamos que los que forman los enlaces  $\sigma$  entre este y cada uno de los dos núcleos de carbono, se encuentran más cerca del núcleo O que de los núcleos C y que la distancia de la región donde más probablemente podríamos encontrarlos al núcleo O es igual en los dos casos. En este caso, por consiguiente, no hay un *tripolo* asimétrico, como en el caso del metanol, sino uno perfectamente simétrico en el que, a pesar de la asimetría del enlace  $\sigma$ , éste no es débil. Una geometría de este tipo es tan poco reactiva que pensamos en los éteres como sustancias inertes.

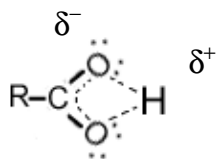
b) El segundo caso,  $R_2C=O$ , es igualmente interesante. Hagamos que R sea H. En este caso tendremos la molécula  $H_2CO$ , aldehído fórmico. Los enlaces  $\sigma$  entre H y C serán del mismo tipo de los que ya hemos discutido. Concentrémonos, entonces, en el enlace C-O. Como primera cosa observaríamos que uno de los electrones no apareados del C se uniría a uno de los del O, dándonos un enlace  $\sigma$  común y corriente. Esto nos dejaría un electrón no apareado del carbono y otro no apareado del oxígeno que se nos acercarían lo suficiente para aparearse dándonos un enlace  $\pi$ . Los cuatro electrones que estarían en la región entre los núcleos C y O estarían en todos los casos más próximos al O que al C. Tenemos, entonces, un fuerte dipolo con un  $\delta^-$  grande sobre el núcleo O y un  $\delta^+$  igualmente grande sobre el núcleo de C. Será fácil entender que este dipolo será altamente reactivo y podrá interactuar fuertemente particularmente con campos positivos.

c) El tercer caso es el de  $R-C-O_2-R$ . Hagamos que el R sea, nuevamente, H. Tendremos entonces la molécula  $HCO_2H$ , más frecuentemente escrita  $HCOOH$ , ácido fórmico. Aquí tenemos que concentrarnos en el carbono. Uno de sus electrones no apareados formará un enlace  $\sigma$  con el electrón del H. Otros dos formarán enlaces  $\sigma$  con uno de los electrones no apareados de cada uno de los dos oxígenos. Esto nos deja con un electrón no apareado en el carbono y un electrón no apareado en cada uno de los dos oxígenos. Lo más simple para resolver la situación, y lo que hacen frecuentemente los libros de texto, es juntar el electrón del carbono con el de cualquiera de los dos oxígenos para darnos un enlace  $\pi$  y hacer un enlace  $\sigma$  utilizando el electrón no apareado del oxígeno restante y el del hidrógeno.

Sin embargo, la situación no es tan sencilla. En primer lugar, encontramos que los núcleos H, C y los dos O se encuentran en el mismo plano y hacen ángulos de  $120^\circ$  entre sí. Es decir, el tetraedro del carbono queda totalmente deformado hasta quedar convertido en un plano. Por el otro lado, ya habíamos mencionado que debido a la mayor fuerza negativa que se encuentra entre dos núcleos cuando entre ellos hay cuatro electrones, como es el caso del enlace  $\pi$ , los núcleos se acercan entre sí. Esta es la razón por la que el doble enlace es significativamente más corto que el enlace  $\sigma$ . Si nosotros observamos la distancia internuclear entre los oxígenos y el carbono, comprobamos que es aproximadamente igual en los dos casos, pero que siendo más corta que la del enlace  $\sigma$ , no lo es tanto como la del doble enlace entre dos núcleos de C como aparece en la tabla de más abajo.

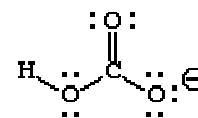
Para entender esta situación, situémonos nuevamente en nuestra posición de experimentadores mentales y observemos lo que pasa alrededor del núcleo del carbono. Observaremos que se han apareado dos electrones del C con uno de cada uno de los O para darnos dos enlaces  $\sigma$ . Al convertir el tetraedro en un plano nos quedan dos electrones no apareados por encima o por debajo del plano que pueden satisfacer su necesidad de apareamiento compartiendo el espacio que se encuentra por encima o por debajo de los tres núcleos. Decimos, entonces, que los electrones  $\pi$  se encuentran deslocalizados. Pero aún así, nos queda un electrón del sistema por compartir con el electrón del hidrógeno. Normalmente esto nos daría un enlace  $\sigma$ . Sin embargo, aunque formalmente sea esto cierto, nos damos cuenta de que posiblemente este par de electrones también estará deslocalizado, pero en el plano en el que se encuentran los núcleos de C y O. Debido a esta geometría particular, será tremendamente lábil, de

manera que si existe un aceptor para el protón en un sistema real, por ejemplo, en agua, el protón tenderá a irse dejando su electrón, y por tanto una carga formal negativa sobre el sistema COO. Esto, que se conoce como comportamiento ácido en reacciones bioquímicas en agua, es de importancia fundamental para la vida. Será fácil entender, también, que el sistema es un dipolo fuertísimo y por consiguiente altamente reactivo. Lo podríamos escribir así:



d) Miremos ahora el caso del CO<sub>2</sub>. Se verá fácilmente que la molécula es lineal: :O=C=O:. Podremos visualizar que entre el C y cada uno de los O se habrá establecido un enlace  $\pi$ . Por consiguiente, los dos pares de electrones apareados de cada uno de los oxígenos se encontrarán en el plano y se constituirán en los dos extremos de la molécula, permitiendo que exista un exceso de carga negativa que irradia de cada uno de los dos extremos. Por las mismas razones que hemos venido examinando, será claro que la molécula es una especie de *tripolo* con una carga parcial positiva sobre el C. Esto hará que, si bien a temperatura ambiente, el CO<sub>2</sub> es un gas, se solidifique muy fácilmente a temperaturas no muy bajas.

e) El último caso es el de R<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, en el que si hacemos que R sea H, tendríamos H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, o ácido carbónico. La geometría de esta molécula es similar a la que discutimos para el ácido fórmico. En efecto, tendremos un sistema planar en el que se encuentran todos los núcleos. El C formará enlaces  $\sigma$  con tres carbonos, habrá un par de electrones  $\pi$  deslocalizados entre dos núcleos de O y el de C, un par de electrones  $\sigma$  que hemos considerado como deslocalizados uniendo un protón a los dos O de ese mismo sistema y, finalmente, el tercer O que además de su enlace  $\sigma$  con el C hará otro enlace  $\sigma$  con el H restante. Como podrá observarse, la geometría del sistema hace que el protón unido al sistema COO sea bastante lábil, lo que le da su característica de ácido en un sistema acuoso. Sin embargo, lo más interesante es que, en presencia de un catalizador, la molécula se reorganiza fácilmente para darnos CO<sub>2</sub> y agua y que si tenemos estas dos moléculas, ellas se combinan para darnos de nuevo H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>. Esta característica es bien importante desde el punto de vista fisiológico.



Hasta aquí hemos considerado a los átomos como sistemas compuestos de centros de carga cuya geometría es tal, que manteniendo una neutralidad formal, permite que irradian de ciertas regiones fuerzas positivas o negativas que son sentidas por otros átomos. Consideramos que en ningún caso puede existir un electrón solitario estable a temperatura ambiente en la tierra, por lo que, si existe en un átomo, violentamente buscará en otro átomo un electrón que tenga sus mismas características, apareándose y formando de esta manera un lazo de unión entre los dos átomos que entonces constituirán una molécula. Al dividir el espacio en tal forma que en una esfera se puedan poner hasta 8 electrones apareados de similar energía, es necesario distribuirlos en forma tal que en promedio ocupen los vértices de un tetraedro. Esta geometría, aunada a los excesos de fuerza positiva o negativa que irradian de las moléculas, en últimas explican el estado de las moléculas y su reactividad. En el capítulo siguiente consideraremos la formación de enlaces desde un punto de vista energético.

No entramos en este módulo a considerar el enlace iónico, ni los enlaces que se pueden establecer entre los electrones apareados propios del N y el O con átomos de transición tales como el hierro y el cobre. Estos se considerarán posteriormente, pero el lector podrá deducir cómo se forman y cuál debe ser la geometría del sistema que los albergue, siguiendo los argumentos que hemos dado en este módulo. Cabe, para terminar, reiterar que el tratamiento que hemos hecho de estos átomos no necesariamente se ajusta al generalmente aceptado, pero es la base para entender más fácilmente la forma como funcionan las macromoléculas tanto como guardianes y transmisores de información, como en virtud de su capacidad para hacer estructuras y llevar a cabo funciones fisiológicas y catalíticas.

### III. LECTURAS RECOMENDADAS

Jaffe, B. **CRUCIBLES, The story of Chemistry**. Fawcett Publications, Inc. 1962. Dalton, pp. 77-92; Thomson, pp.172-187; Moseley, pp.188-204; Langmuir, pp. 205-216  
Brieva, E. **“Erwin Schrödinger y algunos aspectos de la física de su tiempo”**. en MEMORIAS DEL SEMINARIO EN CONMEMORACION DEL CENTENARIO DE ERWIN SCHRÖDINGER. Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. Bogotá. 1987. pp 8-26. Niño, V. **“Interpretación de la Mecánica Cuántica”**. Idem. pp. 110-122. Villaveces, J.L. **“El influjo de la obra de Erwin Schrödinger sobre la química del Siglo XX.”** Idem. pp. 54-67.

### IV. LABORATORIO

Laboratorio sobre espectroscopía. Espectro de la luz blanca. Espectro de una llama de hidrógeno.

### V. AUTOEVALUACION

1. A través de un procedimiento lógico demuestre que una substancia determinada debe estar compuesta de partículas elementales de la misma substancia. De allí deduzca la existencia del átomo.
2. ¿Qué probó el experimento de Rutherford?
3. ¿Cómo se sostiene un electrón alrededor de un núcleo sin caer a él?
4. ¿Cómo se relaciona la velocidad con la energía?
5. ¿Que demostró Planck? ¿Cuál es el significado físico de su constante?
6. ¿Cómo se puede demostrar la dualidad onda-partícula? ¿Hay experimentos que muestren al mismo tiempo la naturaleza de onda y de partícula de un haz de electrones?
7. ¿Qué demostró Schrödinger?

8. ¿Qué es probabilidad? Describa matemáticamente la probabilidad de que ocurra un determinado evento.

9. A través de experimentos mentales construya moléculas de etano, nonano, hexadecano. ¿Que propiedades físicas deben tener estas moléculas a temperatura ambiente? Explique porqué.

10. ¿Qué pasaría si en el primer átomo de C de una cadena de hexadecano Ud. sustituye los tres hidrógenos por OOH? ¿Cómo cambiarían las características físicas y porqué?

11. Si los mares de Júpiter fueran de amoníaco, ¿cómo concebiría Ud. la sangre de un pez que viviera en ese mar?

12. ¿Podría Ud. hacer una molécula tal que sobre un mismo carbono al final de una cadena se enlazaran tanto un COOH como un NH<sub>2</sub>? ¿Qué propiedades tendría?

## VI. TOPICOS PARA UN POSIBLE ENSAYO

1. ¿En qué forma puede un electrón pasar de un orbital a otro a temperatura ambiente en la tierra?

2. ¿Porqué es posible enfocar un haz de electrones con un campo eléctrico? ¿qué aplicaciones podría tener este fenómeno?

3. Describa en forma no matemática una función de probabilidad.

4. Si se considera un átomo de hidrógeno en el espacio interestelar ¿estaría el electrón quieto? ¿Porqué?

5. ¿Porqué no se puede utilizar actualmente agua en motores de explosión, aunque sí se usa gasolina?

6. Construya una molécula en la que intervengan N, O y H y explique sus posibles propiedades.

7. Construya una molécula cíclica utilizando C, H y O que no se encuentre en un sólo plano.

8. Explique las fuerzas de London y su posible papel en el mantenimiento de estructuras moleculares.

9. Explique las fuerzas de van der Waals y muestre su importancia para la vida en la tierra.

10. Explique como se establece un enlace iónico y cuál sería la geometría de una sal del tipo cloruro de sodio a temperatura ambiente-